Liet. matem. rink., T. 41, spec. nr., 526–532

Baigtinių skirtumų metodų taikymas agroekologinių modelių parametrams identifikuoti

Natalija JUŠČENKO, Vitalijus DENISOVAS (KU)
el. paštas: nataly@ik.ku.lt, vitalij@ik.ku.lt

Siūlomas agroekologinių dinaminių modelių parametrinės identifikacijos metodas pagrįstas tiesioginiu parabolinio tipo lygčių sprendimu taikant neišreikštines baigtinių skirtumų schemas ir netiesinę optimizacijos procedūrą sprendžiant normalinių lygčių sistemą. Išvestos rekurentinės formulės, leidžiančios kaupti gradiento ir Hesiano matricos reikšmes tiesioginio uždavinio sprendimo metu. Metodas iliustruojamas konkretaus (šilumos pernešimo dirvožemyje) proceso parametrinės identifikacijos pavyzdžiu. Skaitmeniniuose eksperimentuose naudojami Lietuvos Žemdirbystės instituto lauko bandymų duomenys.

1. Įvadas

Agroekologinių sistemų dinamikos informacinė modeliavimo sistema sukurta bendradarbiaujant Klaipėdos universitetui, Lietuvos Žemdirbystės institutui ir St. Peterburgo Agrofizikinių tyrimų institutui [1–3, 5, 6]. Baziniame sistemos modelyje aprašomi pagrindiniai procesai vykstantys sistemoje „dirvožemis-augalas-atmosfera" [3, 5]. Tokios klasės modeliuose energijos ir masės apykaitos procesai paprastai aprašomi pernešimo lygtimis su pradinėmis ir kraštinėmis sąlygomis. Straipsnyje aprašytas minėtų lygčių parametrų identifikacijos metodas nagrinėjamas šilumos pernešimo dirvožemyje proceso pavyzdžiu.

Šilumos pernešimo dirvožemyje procesas agroekosistemos dinamikos modelyje aprašytas paraboline lygtimi [5]:

$$c_s(w)\frac{\partial T_s(t,x)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\lambda_s(w)\frac{\partial T_s(t,x)}{\partial x}, \quad x \in (0,l), \ t > 0. \tag{1.1}$$

Kraštinės sąlygos apibrėžtos dirvožemio paviršiuje ($x = 0$) bei apatiniame šaknų sluoksnyje ($x = l$):

$$T_s(t,l) = const, \tag{1.2}$$
$$T_s(t,0) = \Psi(t). \tag{1.3}$$

Pradinės sąlygos suformuluotos laiko momentu $t = 0$:

$$T_s(0,x) = \varphi(x). \tag{1.4}$$

Lygtyse (1.1)–(1.4) $T_s(t,x)$ – dirvožemio temperatūros profilis, $c_s(w)$ – dirvožemio tūrio šilumos imlumas, $\lambda_s(w)$ – dirvožemio šilumos laidumas ir w – dirvožemio tūrio drėgmė. Įvairiems dirvožemio tipams parametrai $c_s(w)$ ir $\lambda_s(w)$ gali būti aprašyti lygtimis (1.5)–(1.6) [4]:

$$c_s(w) = c_w w + c_{ss}\rho_s, \tag{1.5}$$
$$\lambda_s(w) = c_s\left[\alpha_1(w-\alpha_4)^2 + \rho_s\alpha_2 + \alpha_3\right], \tag{1.6}$$

čia c_w – dirvožemio drėgmės šilumos imlumas, c_{ss} – dirvožemio dalelių šilumos imlumas, ρ_s – dirvožemio tankis.

Parametrinės identifikacijos uždavinys formuluojamas kaip vektoriaus $\beta = \left[c_{ss}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4\right]^T$ reikšmių vertinimo minimizuojant kvadratinių nuostolių funkciją $Q(\beta)$ uždavinys:

$$\min_\beta Q(\beta) = \left\{\left[T - \widehat{T}(\beta)\right]^T \Gamma \left[T - \widehat{T}(\beta)\right]\right\}, \tag{1.7}$$

čia $\widehat{T}(\beta)$ – apskaičiuotas dirvožemio temperatūros profilis, T – bandymuose išmatuotas dirvožemio temperatūros profilis ir $\Gamma = diag\left[\gamma_i\right]$ – svorio koeficientų matrica.

2. Šilumos pernešimo dirvožemyje lygties tiesioginio uždavinio sprendimas baigtinių skirtumų metodu

Skaitiniam sprendimui uždavinys (1.1)–(1.4) aproksimuojamas neišreikštine baigtinių skirtumų schema (2.1–2.3):

$$c^j_{i,i-1}T^{j+1}_{i-1} - c^j_{i,i}T^{j+1}_i + c^j_{i,i+1}T^{j+1}_{i+1} = -a^j_i, \tag{2.1}$$

čia $\{x_i\}, i = \overline{1,n},$ – erdvinės gardelės mazgai, $T^j_i = T(t_j, x_i)$ – dirvožemio temperatūros reikšmė i-jame mazge j-ju laiko momentu, h_i – i-jo sluoksnio plotis,

$$\begin{aligned}
&\overline{h}_{i+1} = \frac{h_i + h_{i+1}}{2}, \quad \overline{\lambda}^j_{i+1} = \lambda\left(\overline{w}^j_{i+1}\right),\\
&\overline{w}^j_{i+1} = \frac{w^j_{i+1}h_{i+1} + w^j_i h_i}{h_i + h_{i+1}}, \quad i = \overline{1,n};\\
&c_{i,i-1} = \tau\overline{h}_{i+1}\overline{\lambda}_i, \quad c_{i,i+1} = \tau\overline{h}_i\overline{\lambda}_{i+1},\\
&c_{i,i} = -(c_{i,i-1} + c_{i,i+1} + h_i\overline{h}_{i+1}\overline{h}_i c_{si}),\\
&a_i = -h_i\overline{h}_{i+1}\overline{h}_i c_{si}T^j_i, \quad i \neq 1 \vee n.
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Priklausomai nuo kraštinių sąlygų tipo, $l = 1 \vee n$:

$$\begin{cases} c_{l,l} \neq 0, \\ c_{l,l-1} = c_{l,l+1} = 0, \end{cases} \qquad \text{I rūšies,}$$
$$\begin{cases} c_{l,l-1} = 0, \ \ c_{l,l} = c_{l,l+1} \neq 0, \\ c_{l,l-1} = c_{l,l} \neq 0, \ \ c_{l,l+1} = 0, \end{cases} \qquad \text{II rūšies,} \tag{2.3}$$
$$\begin{cases} c_{l,l-1} = 0, \ \ c_{l,l} \neq c_{l,l+1} \neq 0, \\ c_{l,l-1} \neq c_{l,l} \neq 0, \ \ c_{l,l+1} = 0, \end{cases} \qquad \text{III rūšies.}$$

Sistema (2.1)–(2.3) gali būti užrašyta matriciniame pavidale:

$$C^j T^{j+1} = D^j T^j, \tag{2.4}$$

čia $T^j = \left[T_1^j, T_2^j, \ldots, T_n^j\right]^T$, $T^{j+1} = \left[T_1^{j+1}, T_2^{j+1}, \ldots, T_n^{j+1}\right]^T$ – būsenos vektoriai atitinkamais laiko momentais j ir $j+1$, $D^j = diag(h_i \bar{h}_{i+1} \bar{h}_i c_{si})$, matrica C^j turi triįstrižainę struktūrą.

Visam laiko intervalui (pvz., visam pasėlio vegetaciniam sezonui) sistema (2.4) gali būti užrašyta blokinėje formoje:

$$GT = X \tag{2.5}$$

arba

$$\begin{bmatrix} C^0 & 0 & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & 0 \\ -D^1 & C^1 & 0 & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & 0 \\ 0 & -D^2 & C^2 & 0 & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & \ldots & 0 & -D^j & C^j & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & 0 & -D^{L-1} & C^{L-1} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} T^1 \\ T^2 \\ T^3 \\ \ldots \\ T^{j+1} \\ \ldots \\ T^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D^0 T^0 \\ 0 \\ 0 \\ \ldots \\ 0 \\ \ldots \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{2.6}$$

čia L – tiesioginio uždavinio laiko žingsnių skaičius, $j = \overline{1, L}$. Tokio tiesioginio uždavinio sprendimas:

$$T = G^{-1} X. \tag{2.7}$$

3. Atvirkštinio uždavinio skaitinis sprendimas

Iš lygties (1.7) išplaukia normalinių lygčių sistema (3.1):

$$\begin{aligned}\frac{\partial Q(\beta)}{\partial \beta} &= \frac{\partial \widehat{T}(\beta)}{\partial \beta}\Gamma\left[T-\widehat{T}(\beta)\right] \\ &= \frac{\partial\left[G^{-1}(\beta)\,X(\beta)\right]}{\partial \beta}\Gamma\left[T-G^{-1}(\beta)\,X(\beta)\right]=0 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Sistema (3.1) yra netiesinė parametrų β atžvilgiu todėl $Q(\beta)$ minimizacijai pageidautina taikyti gradientinius metodus. Tačiau dėl aukštos matricos (3.1) dimensijos tiesioginis šių metodų taikymas sunkiai įgyvendinamas. Žemiau siūlomas rekurentinis metodas leidžia kaupti gradiento bei Hesiano matricos analogo reikšmes tiesioginio uždavinio sprendimo metu.

Sistemos (3.1) sprendimui taikomas modifikuotas Markvardto minimizacijos metodas su reguliarizacija:

$$\beta^{l+1}=\beta^{l}+\left(P^{T}\Gamma P+\mu R\right)^{-1}P^{T}\Gamma\left[T-\widehat{T}(\beta^{l})\right], \tag{3.2}$$

čia l – iteracijos numeris, μ – reguliarizacijos parametras,

$$P=\left.\frac{\partial \widehat{T}(\beta)}{\partial \beta}\right|_{\beta=\beta^{l}}=\frac{\partial\left[G^{-1}(\beta)X(\beta)\right]}{\partial \beta}=\left[-G^{-1}\frac{\partial G(\beta)}{\partial \beta}G^{-1}X+G^{-1}\frac{\partial X}{\partial \beta}\right]$$

sprendinio dalinių išvestinių pagal parametrus matrica, $R=diag(P^{T}\Gamma P)$ arba $R=I$.

Kadangi narys

$$G^{-1}\frac{\partial X}{\partial \beta}=0$$

visur, išskyrus pirmą tiesioginio uždavinio žingsnį, jį galima praleisti. Taip pat pastebėtina, kad $G^{-1}X=\widehat{T}(\beta)$ ir $\frac{\partial G(\beta)}{\partial \beta}=\left[\left[\frac{\partial G}{\partial \beta_1}\right],\left[\frac{\partial G}{\partial \beta_2}\right],\ldots,\left[\frac{\partial G}{\partial \beta_m}\right]\right]$. Taigi atvirkštinis uždavinys susiveda į matricos G^{-1} skaičiavimą.

Taikant Frobeniuso formulę atvirkštinės blokinės matricos radimui bei blokinį gretinimo metodo analogą, galima parodyti, kad matricos G^{-1} elementai gali būti apskaičiuoti pagal tokias rekurentines išraiškas:

$$S=G^{-1}=$$

$$=\begin{bmatrix}(C^{0})^{-1} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0\\ (C^{1})^{-1}D^{1}(C^{0})^{-1} & (C^{1})^{-1} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0\\ (C^{2})^{-1}D^{2}(C^{1})^{-1}D^{1}(C^{0})^{-1} & (C^{2})^{-1}D^{2}(C^{1})^{-1} & (C^{2})^{-1} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0\\ (C^{L-1})^{-1}D^{L-1}S_{1}^{L-2} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & (C^{L-1})^{-1}D^{L-1}S_{M}^{L-1} & \cdots & (C^{L-1})^{-1}\end{bmatrix},$$

$$M<L-1.$$

Pažymėję

$$V_k = \frac{\partial G(\beta)}{\partial \beta_k} \widehat{T}(\beta), \quad B^j = \frac{\partial C^j}{\partial \beta_k}, \quad F^j = \frac{\partial D^j}{\partial \beta_k}, \quad k = \overline{1,m}, \quad j = 1, L$$

turėsime

$$V_k = \begin{bmatrix} B^0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ F^1 & B^1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & F^2 & B^2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & F^j & B^j & 0 \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & F^{L-1} & B^{L-1} \end{bmatrix}$$

$$\times \begin{bmatrix} T^1 \\ T^2 \\ T^3 \\ \dots \\ T^{j+1} \\ \dots \\ T^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B^0 T^1 \\ F^1 T^1 + B^1 T^2 \\ F^2 T^2 + B^2 T^3 \\ \dots \\ F^j T^j + B^j T^{j+1} \\ \dots \\ F^{L-1} T^{L-1} + B^{L-1} T^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V^1 \\ V^2 \\ V^3 \\ \dots \\ V^{j+1} \\ \dots \\ V^L \end{bmatrix}$$

ir

$$P_k = G^{-1} V_k = S V_k =$$

$$= \begin{bmatrix} (C^0)^{-1} V^1 \\ (C^1)^{-1} D^1 (C^0)^{-1} V^1 + (C^1)^{-1} V^2 \\ \dots \\ (C^j)^{-1} D^j S_1^{j-1} V^1 + (C^j)^{-1} D^j S_2^{j-1} V^2 + \dots + (C^j)^{-1} V^{j+1} \\ \dots \\ (C^{L-1})^{-1} D^{L-1} S_1^{L-2} V^1 + + \dots + (C^{L-1})^{-1} V^L \end{bmatrix}.$$

Arba

$$P_k^j = (C^j)^{-1} \left[D^j P_k^{j-1} + F^j T^{j-1} + B^j T^j \right]. \tag{3.3}$$

Iš (3.3) aišku, kad Hesiano analogo matricos elementai

$$H = P^T \Gamma P = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ h_{m1} & h_{m2} & \dots & h_{mm} \end{bmatrix}$$

gali būti kaupiami tiesioginio uždavinio sprendimo metu:

$$h_{rq} = \sum_{j=1}^{L} p_{rj}\gamma_r p_{jq}, \quad h_{rq}^{j+1} = h_{rq}^{j} + p_r^j \gamma_r^j p_q^j, \quad r, q = \overline{1, m}. \tag{3.4}$$

4. Algoritmas ir skaičiavimo rezultatai

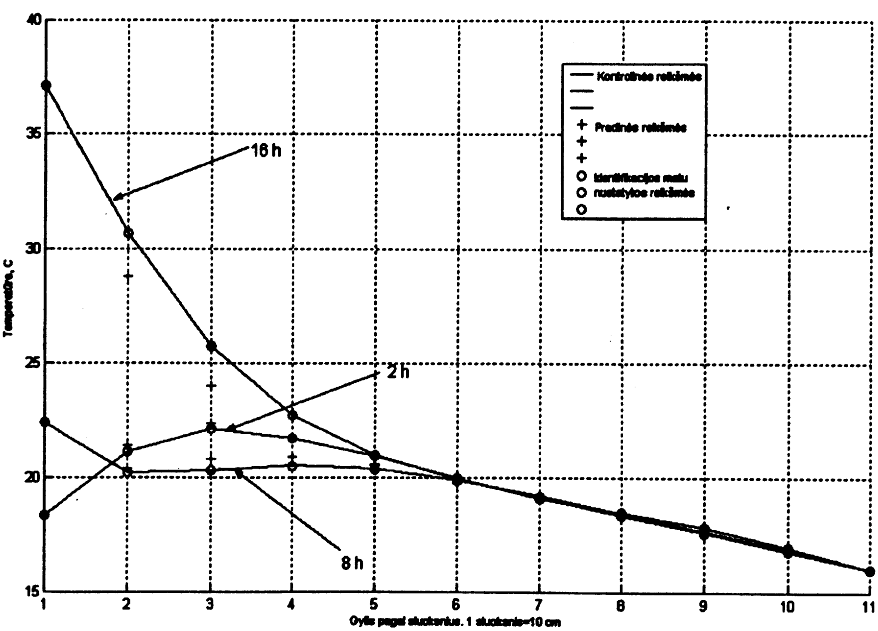
Siūlomo identifikacijos metodo algoritmas susideda iš tokių žingsnių kartojimo:

a) pilnos apimties tiesioginio uždavinio (2.5) sprendimas su lygiagrečiu matricų P ir H elementų (3.3 ir 3.4) ir kriterijaus Q reikšmių kaupimu;

b) parametrų vektoriaus β reikšmių įvertinimas atliekant vieną iteracinio proceso (3.2) žingsnį;

c) jei pasiektas reikiamas parametrų vertinimo tikslumas arba įvykdytas nustatytas iteracinio proceso žingsnių skaičius, skaičiavimo procesas nutraukiamas; priešingu atveju – grįžtama į punktą a).

Aprašytas algoritmas realizuotas paketo MatLab 5.3 priemonėmis [7]. MatLab programą sudaro 3 algoritmo žingsnius atitinkančios funkcijos. Programa leidžia pasirinkti skirtingų eksperimentinių duomenų failus, pradines parametrų reikšmes, žingsnių skaičių, tikslumą ir kt. bei suteikia vartotojui galimybę interaktyviai keisti reguliarizacijos parametrą μ išraiškoje (3.2).



1 pav. Dirvožemio temperatūros profiliai.

Metodas taikomas praktikoje adaptuojant agroekosistemų dinamikos modelį prie skirtingų Lietuvos dirvožemio ir klimato sąlygų. Tam naudojami duomenis iš Lietuvos žemdirbystės instituto lauko bandymų, vykdomų trijose bandymų stotyse, Trakų Vokėje, Dotnuvoje (Vilainiuose) ir Vėžaičiuose. Bandymuose gauti duomenys yra apdoroti ir sukaupti agoekologinio modeliavimo sistemos DIASPORA duomenų bazėje [1, 2]. Pradinės parametrų $c_s(w)$ ir $\lambda_s(w)$ reikšmės buvo parinktos pagal atitinkamų dirvožemių tipus naudojant plačiai taikomas agrofizikoje rekomendacijas, pateiktas lentelėse [4, 5].

Žemiau pateiktas tipinis algoritmo aprobacijos (parametrų vertinimo) pavyzdys. Tiesioginio uždavinio žingsnių skaičius – 24 (viena para). Pradinės parametrų vektoriaus β reikšmės:

$\beta_0 = [0,3;\ -468;\ 11,2;\ 4,36;\ 0,02]$.

Parametrų vektoriaus β reikšmės 30-je algoritmo iteracijoje ($n = 30$):

$\beta_n = [0,1;\ -92;\ 11,3;\ 4,66;\ 0,09]$.

Pradinė minimizuojamo kriterijaus (nuostolių funkcijos) reikšmė – 75,63, galutinė – 0,1. 1 pav. pateiktas dirvožemio temperatūros profilių, apskaičiuotų naudojant identifikuotus parametrus, ir eksperimentinių duomenų palyginimas.

Literatūra

[1] V. Denisov, Development of the Crop Simulation System DIASPORA, *Agronomy Journal*, 93(3), 660–666 (2001).

[2] V. Denisovas, N. Juščenko, A. Adomkus, D. Lukianienė, I. Lamsodienė, M. Eidukevičienė, Duomenų modeliavimo aspektai kuriant integruotą agroekologinę informacinę sistemą, *Tausojanti plėtra informacinėje visuomenėje*, 37–44, Vilnius (2000).

[3] D. Lukianienė, I. Lamsodienė, V. Denisovas, E. Grušelionis, R. Kaulakys, Žemės ūkio augalų vystymosi ir derliaus prognozavimo dinaminis modelis, *Žemdirbystė, LŽU mokslo darbai*, Dotnuva-Akademija, 52, 279–290 (1996).

[4] С.В. Нерпин, А.И. Чудновский, *Энерго- и массообмен в системе "почва-растение-атмосфера"*, Ленинград, Гидрометеоиздат (1975).

[5] Р.А. Полуэктов, *Динамические модели агроэкосистемы*, Ленинград, Гидрометеоиздат (1991).

[6] R.A. Poluektov, V.A. Kumakov, G.V. Vasilenko, Simulation of transpiration of crop stands, *Russian Plant Physiology*, 44(1–2), 68–72 (1997).

[7] В.Г. Потемкин, *Система MatLab*, Справочное пособие, Москва, Диалог-МИФИ (1997).

Application of finite-difference methods to parameter identification of agroecological models

N. Juščenko, V. Denisov

A typical parameter identification problem arisen in agroecological modeling is described and a finite difference method to solve an appropriate inverse problem is proposed. The method supposes the direct solution of an initial-boundary problem by finite difference scheme and then uses a non-linear optimization routine for parameter estimation. The derived recurrent formulas allow the accumulation of values of gradient and Hessian matrices while solving the direct problem. The software algorithm is described and some numerical results are given for the particular soil heat transfer parameter estimation exercise using the field treatment data collected at the Lithuanian Institute of Agriculture.